

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Vierte Auflage

Viertes Ergänzungswerk
Die Literatur von 1950 bis 1959 umfassend

Herausgegeben vom
Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie
Frankfurt am Main

Bearbeitet von

Reiner Luckenbach

Unter Mitwirkung von

Oskar Weissbach

Erich Bayer · Adolf Fahrmeir · Friedo Giese · Volker Guth · Irmgard Hagel
Franz-Josef Heinen · Günter Imsieke · Ursula Jacobshagen · Rotraud Kayser
Klaus Koulén · Bruno Langhammer · Dieter Liebegott · Lothar Mähler
Annerose Naumann · Wilma Nickel · Burkhard Polenski · Peter Raig
Helmut Rockelmann · Jürgen Schunck · Eberhard Schwarz · Josef Sunkel
Achim Trede · Paul Vincke

Sechster Band

Vierter Teil

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Vierte Auflage

Viertes Ergänzungswerk

Die Literatur von 1950 bis 1959 umfassend

Herausgegeben vom
Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie
Frankfurt am Main

Bearbeitet von

Reiner Luckenbach

Unter Mitwirkung von

Oskar Weissbach

Erich Bayer · Adolf Fahrmeir · Friedo Giese · Volker Guth · Irmgard Hagel
Franz-Josef Heinen · Günter Inisieke · Ursula Jacobshagen · Rotraud Kayser
Klaus Koulen · Bruno Langhammer · Dieter Liebegott · Lothar Mähler
Annerose Naumann · Wilma Nickel · Burkhard Polenski · Peter Raig
Helmut Rockelmann · Jürgen Schunck · Eberhard Schwarz · Josef Sunkel
Achim Trede · Paul Vincke

Sechster Band

Vierter Teil



Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York 1979

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Neuauflage

Verlagsgesellschaft

1979

1979

1979

1979

1979

1979

1979

Das Handbuch der Organischen Chemie ist ein Standardwerk für alle, die sich mit der Organischen Chemie beschäftigen. Es enthält alle wichtigen Reaktionen, Eigenschaften und Synthesen der organischen Verbindungen. Das Handbuch ist in 17 Bänden unterteilt, die jeweils einen bestimmten Bereich der Organischen Chemie behandeln. Die Bände sind: 1. Alkohole, Aldehyde, Ketone, Carbonsäuren, Amine, Nitrile; 2. Kohlenwasserstoffe; 3. Halogenkohlenwasserstoffe; 4. Kohlenstoffverbindungen; 5. Stickstoffverbindungen; 6. Phosphorverbindungen; 7. Schwefelverbindungen; 8. Selenverbindungen; 9. Tellurverbindungen; 10. Borverbindungen; 11. Siliciumverbindungen; 12. Zinnverbindungen; 13. Bleiverbindungen; 14. Kupferverbindungen; 15. Silberverbindungen; 16. Goldverbindungen; 17. Platinverbindungen.

ISBN 3-540-09650-7 Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York
ISBN 0-387-09650-7 Springer-Verlag, New York · Heidelberg · Berlin

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. im Beilstein-Handbuch berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten

© by Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg 1979
Library of Congress Catalog Card Number: 22—79
Printed in Germany

Satz, Druck- und Bindearbeiten: Universitätsdruckerei H. Stürtz AG, Würzburg

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Mitarbeiter der Redaktion

Helmut Appelt	Sok Hun Lim
Gerhard Aulmich	Gerhard Maleck
Gerhard Bambach	Edith Meier
Klaus Baumberger	Kurt Michels
Elise Blazek	Ingeborg Mischon
Kurt Bohg	Klaus-Diether Möhle
Reinhard Bollwan	Gerhard Mühle
Jörg Bräutigam	Heinz-Harald Müller
Ruth Brandt	Ulrich Müller
Eberhard Breither	Peter Otto
Werner Brich	Rainer Pietschmann
Stephanie Corsepilus	Helga Pradella
Edgar Deuring	Hella Rabien
Ingeborg Deuring	Walter Reinhard
Reinhard Ecker	Gerhard Richter
Irene Eigen	Lutz Rogge
Hellmut Fiedler	Günter Roth
Franz Heinz Flock	Liselotte Sauer
Manfred Frodl	Siegfried Schenk
Ingeborg Geibler	Max Schick
Libuse Goebels	Joachim Schmidt
Gerhard Grimm	Werner Schmidt
Karl Grimm	Gerhard Schmitt
Friedhelm Gundlach	Thilo Schmitt
Hans Härter	Peter Schomann
Alfred Haltmeier	Wolfgang Schütt
Erika Henseleit	Wolfgang Schurek
Karl-Heinz Herbst	Bernd-Peter Schwendt
Ruth Hintz-Kowalski	Wolfgang Staehle
Guido Höffer	Wolfgang Stender
Eva Hoffmann	Karl-Heinz Störr
Horst Hoffmann	Gundula Tarrach
Werner Hoffmann	Hans Tarrach
Gerhard Hofmann	Elisabeth Tauchert
Gerhard Jooss	Mathilde Urban
Klaus Kinsky	Rüdiger Walentowski
Heinz Klute	Hartmut Wehrt
Ernst Heinrich Koetter	Hedi Weissmann
Irene Kowol	Frank Wente
Alfred Lang	Ulrich Winckler
Gisela Lange	Renate Wittrock

Hinweis für Benutzer

Falls Sie Probleme beim Arbeiten mit dem Beilstein-Handbuch haben, ziehen Sie bitte den vom Beilstein-Institut entwickelten „Leitfaden“ zu Rate. Er steht Ihnen — ebenso wie weiteres Informationsmaterial über das Beilstein-Handbuch — auf Anforderung kostenlos zur Verfügung.

Beilstein-Institut
für Literatur der Organischen Chemie
Varrentrappstrasse 40—42
D-6000 Frankfurt/M. 90

Springer-Verlag KG
Abt. 4005
Heidelberger Platz 3
D-1000 Berlin 33

Note for Users

Should you encounter difficulties in using the Beilstein Handbook please refer to the guideline "How to Use Beilstein", developed for users by the Beilstein Institute. This guideline (also available in Japanese), together with other informational material on the Beilstein Handbook, can be obtained free of charge by writing to

Beilstein-Institut
für Literatur der Organischen Chemie
Varrentrappstrasse 40—42
D-6000 Frankfurt/M. 90

Springer-Verlag KG
Abt. 4005
Heidelberger Platz 3
D-1000 Berlin 33

For those users of the Beilstein Handbook who are unfamiliar with the German language, a pocket-format "Beilstein Dictionary" (German/English) has been compiled by the Beilstein editorial staff and is also available free of charge. The contents of this dictionary are also to be found in the present volume on pages LXV to LXXXIX.

Abkürzungen und Symbole¹⁾

A.	Äthanol
Acn.	Aceton
Ae.	Diäthyläther
äthanol.	äthanolisch
alkal.	alkalisch
Anm.	Anmerkung
at	technische Atmosphäre ($98\,066,5\text{ N}\cdot\text{m}^{-2} = 0,98\,0665$ $\text{bar} = 735,559\text{ Torr}$)
atm	physikalische Atmosphäre
Aufl.	Auflage
B.	Bildungsweise(n), Bildung
Bd.	Band
Bzl.	Benzol
bzw.	beziehungsweise
c	Konzentration einer optisch aktiven Verbindung in g/100 ml Lösung
D	1) Debye (Dimension des Dipol- moments) 2) Dichte (z.B. D_4^{20} : Dichte bei 20° bezogen auf Wasser von 4°)
d	Tag
$D(R-X)$	Dissoziationsenergie der Ver- bindung RX in die freien Radi- kale R^\bullet und X^\bullet
Diss.	Dissertation
DMF	Dimethylformamid
DMSO	Dimethylsulfoxid
E	1) Erstarrungspunkt 2) Ergänzungswerk des Beilstein-Handbuchs
E.	Äthylacetat
Eg.	Essigsäure (Eisessig)
engl. Ausg.	englische Ausgabe
EPR	Elektronen-paramagnetische Resonanz (= ESR)
F	Schmelzpunkt (-bereich)
Gew.-%	Gewichtszprozent
grad	Grad
H	Hauptwerk des Beilstein- Handbuchs
h	Stunde
Hz	Hertz (= s^{-1})
K	Grad Kelvin
konz.	konzentriert
korr.	korrigiert

¹⁾ Bezüglich weiterer, hier nicht aufgeführter Symbole und Abkürzungen für physikalisch-chemische Größen und Einheiten s.

International Union of Pure and Applied Chemistry Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units (1969) [London 1970].

Abbreviations and symbols²⁾

ethanol
acetone
diethyl ether
solution in ethanol
alkaline
footnote
technical atmosphere
physical (standard) atmosphere
edition
formation
volume
benzene
or, respectively
concentration of an optically active compound in g/100 ml solution
1) Debye (dimension of dipole moment)
2) density (e.g. D_4^{20} : density at 20° related to water at 4°)
day
dissociation energy of the compound RX to form the free radicals R^\bullet and X^\bullet
dissertation, thesis
dimethylformamide
dimethyl sulfoxide
1) freezing (solidification) point
2) Beilstein supplementary series
ethyl acetate
acetic acid
english edition
electron paramagnetic resonance (= ESR)
melting point (range)
percent by weight
degree
Beilstein basic series
hour
cycles per second (= s^{-1})
degree Kelvin
concentrated
corrected

²⁾ For other symbols and abbreviations for physicochemical quantities and units not listed here see

Kp	Siedepunkt (-bereich)	boiling point (range)
l	1) Liter	1) litre
	2) Rohrlänge in dm	2) length of cell in dm
$[M]_{\lambda}^t$	molares optisches Drehungsvermögen für Licht der Wellenlänge λ bei der Temperatur t	molecular rotation for the wavelength λ and the temperature t
m	1) Meter	1) metre
	2) Molarität einer Lösung	2) molarity of solution
Me.	Methanol	methanol
n	1) bei Dimensionen von Elementarzellen: Anzahl der Moleküle pro Elementarzelle	1) number of formula units in the unit cell
	2) Normalität einer Lösung	2) normality of solution
	3) nano (= 10^{-9})	3) nano (= 10^{-9})
	4) Brechungsindex (z.B. $n_{656,1}^{15}$: Brechungsindex für Licht der Wellenlänge 656,1 nm bei 15°)	4) refractive index (e.g. $n_{656,1}^{15}$: refractive index for the wavelength 656.1 nm and 15°)
NQR	Kernquadrupolresonanz	nuclear quadrupole resonance
opt.-inakt.	optisch inaktiv	optically inactive
p	Konzentration einer optisch aktiven Verbindung in g/100 g Lösung	concentration of an optically active compound in g/100 g solution
PAe.	Petroläther, Benzin, Ligroin	petroleum ether, ligroin
Py.	Pyridin	pyridine
S.	Seite	page
s	Sekunde	second
s.	siehe	see
s. a.	siehe auch	see also
s. o.	siehe oben	see above
sog.	sogenannt	so called
Spl.	Supplement	supplement
... stdg.	... stündig (z.B. 3-stündig)	for ... hours (e.g. for 3 hours)
s. u.	siehe unten	see below
Syst.-Nr.	System-Nummer	system number
THF	Tetrahydrofuran	tetrahydrofuran
Tl.	Teil	part
Torr	Torr (= mm Quecksilber)	torr (= millimetre of mercury)
unkorr.	unkorrigiert	uncorrected
unverd.	unverdünnt	undiluted
verd.	verdünnt	diluted
vgl.	vergleiche	compare (cf.)
wss.	wässrig	aqueous
z. B.	zum Beispiel	for example (e.g.)
Zers.	Zersetzung	decomposition
zit. bei	zitiert bei	cited in
α_{λ}^t	optisches Drehungsvermögen (Erläuterung s. bei $[M]_{\lambda}^t$)	angle of rotation (for explanation see $[M]_{\lambda}^t$)
$[\alpha]_{\lambda}^t$	spezifisches optisches Drehungsvermögen (Erläuterung s. bei $[M]_{\lambda}^t$)	specific rotation (for explanation see $[M]_{\lambda}^t$)
ϵ	1) Dielektrizitätskonstante	1) dielectric constant, relative permittivity
	2) Molarer dekadischer Extinktionskoeffizient	2) molar extinction coefficient
$\lambda_{(\max)}$	Wellenlänge (eines Absorptionsmaximums)	wavelength (of an absorption maximum)
μ	Mikron (= 10^{-6} m)	micron (= 10^{-6} m)
°	Grad Celsius oder Grad (Drehungswinkel)	degree Celsius or degree (angle of rotation)

Abkürzungen für in Peptiden vorkommende „natürliche“ Aminosäuren

Abbreviations for “naturally occurring” amino acids in peptides

Alanin	Ala	Leucin	Leu
β -Alanin	β Ala	Lysin	Lys
Arginin	Arg	Methionin	Met
Asparagin	Asp(NH ₂)	Ornithin	Orn
Asparaginsäure	Asp	Phenylalanin	Phe
Cystein	Cys	Prolin	Pro
2,4-Diamino-buttersäure	Dab	Sarkosin	Sar
Glutamin	Glu(NH ₂)	Serin	Ser
Glutaminsäure	Glu	Threonin	Thr
Glycin	Gly	Thyronin	Thy
Histidin	His	Tryptophan	Trp
<i>trans</i> -4-Hydroxy-L-prolin	Pro(4 <i>t</i> -OH)	Valin	Val
Isoleucin	Ile		

Abkürzungen für Peptid-Schutzgruppen

Abbreviations for protecting groups in peptides

a) der Amino-Gruppe:

Acetyl
Benzoyl
Benzyl
Benzyloxycarbonyl PhCH₂OCO
(früher „Carbobenzoxy“; Cbo oder BZO)
tert-Butyloxycarbonyl (CH₃)₃COCO
Formyl
3-Nitro-benzoyl
Toluol-4-sulfonyl (Tosyl)
Trifluoracetyl
Trityl

Ac-
Bz-
PhCH₂-
Z-
Boc-
HCO-
Bz(3-NO₂)
Tos-
CF₃CO-
Trt-

b) der Carboxy-Gruppe:

-äthylester
-benzylester
-*tert*-butylester
-methylester
-[4-nitro-benzylester]

O-C₂H₅
O-CH₂Ph
O-tBu
O-CH₃
ONB

Stereochemische Bezeichnungen

Übersicht

Präfix	Definition in §	Symbol	Definition in §
<i>allo</i>	5c, 6c	<i>c</i>	4a—e
<i>altro</i>	5c, 6c	c_F	7a
<i>anti</i>	3a, 9	D	6a, b, c
<i>arabino</i>	5c	D_g	6b
cat_F	7a	D_r	7b
<i>cis</i>	2	D_s	6b
<i>endo</i>	8	(<i>e</i>)	3b
<i>ent</i>	10e	(<i>E</i>)	3a
<i>erythro</i>	5a	L	6a, b, c
<i>exo</i>	8	L_g	6b
<i>galacto</i>	5c, 6c	L_r	7b
<i>gluco</i>	5c, 6c	L_s	6b
<i>glycero</i>	6c	<i>r</i>	4c, d, e
<i>gulo</i>	5c, 6c	r_F	7a
<i>glycero</i>	6c	(<i>r</i>)	1a
<i>gulo</i>	5c, 6c	(<i>R</i>)	1a
<i>ido</i>	5c, 6c	(R_a)	1b
<i>lyxo</i>	5c	(R_p)	1b
<i>manno</i>	5c, 6c	(\overline{RS})	1a
<i>meso</i>	5b	(<i>s</i>)	1a
<i>rac</i>	10e	(<i>S</i>)	1a
<i>racem.</i>	5b	(S_a)	1b
<i>rel</i>	1c	(S_p)	1b
<i>ribo</i>	5c	<i>t</i>	4a—e
<i>s-cis</i>	3b	t_F	7a
<i>seqcis</i>	3a	(<i>z</i>)	3b
<i>seqtrans</i>	3a	(<i>Z</i>)	3a
<i>s-trans</i>	3b	α	10a, c, d
<i>syn</i>	3a, 9	α_F	10b, c
<i>talo</i>	5c, 6c	β	10a, c, d
<i>threo</i>	5a	β_F	10b, c
<i>trans</i>	2	ξ	11a
<i>xylo</i>	5c	(ξ)	11c
		Ξ	11b
		(Ξ)	11b
		(Ξ_a)	11c
		(Ξ_p)	11c
		*	12

- § 1. a) Die Symbole (*R*) und (*S*) bzw. (*r*) und (*s*) kennzeichnen die absolute Konfiguration an Chiralitätszentren (Asymmetriezentren) bzw. „Pseudoasymmetriezentren“ gemäss der „Sequenzregel“ und ihren Anwendungsvorschriften (*Cahn, Ingold, Prelog, Experientia* **12** [1956] 81; *Ang. Ch.* **78** [1966] 413, 419; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** [1966] 385, 390, 511; *Cahn, Ingold, Soc.* **1951** 612; s. a. *Cahn, J. chem. Educ.* **41** [1964] 116, 508):

Zur Kennzeichnung der Konfiguration von Racematen aus Verbindungen mit mehreren Chiralitätszentren dienen die Buchstabenpaare (*RS*) und (*SR*), wobei z. B. durch das Symbol (*1RS,2SR*) das aus dem (*1R,2S*)-Enantiomeren und dem (*1S,2R*)-Enantiomeren bestehende Racemat spezifiziert wird (vgl. *Cahn, Ingold, Prelog, Ang. Ch.* **78** 435; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** 404).

Das Symbol (*RS*) kennzeichnet ein Gemisch von annähernd gleichen Teilen des (*R*)-Enantiomeren und des (*S*)-Enantiomeren.

Beispiele:

(*R*)-Propan-1,2-diol [E IV **1** 2468]

(*1R,3S,4S*)-3-Chlor-*p*-menthan [E IV **5** 152]

(*3aR:4S:8R:8aS:9s*)-9-Hydroxy-2.2.4.8-tetramethyl-decahydro-4.8-methano-azulen [E III **6** 425]

(*1RS,2SR*)-2-Amino-1-benzo[1,3]dioxol-5-yl-propan-1-ol [E III/IV **19** 4221]

(*2RS,4'R,8'R*)- β -Tocopherol [E III/IV **17** 1427]

- b) Die Symbole (*R_a*) und (*S_a*) bzw. (*R_p*) und (*S_p*) werden in Anlehnung an den Vorschlag von *Cahn, Ingold* und *Prelog* (*Ang. Ch.* **78** 437; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** 406) zur Kennzeichnung der Konfiguration von Elementen der axialen bzw. planaren Chiralität verwendet.

Beispiele:

(*R_a*)-1,11-Dimethyl-5,7-dihydro-dibenz[*c,e*]oxepin [E III/IV **17** 642]

(*R_a:S_a*)-3.3'.6'.3''-Tetrabrom-2'.5'-bis-[(1*R*)-menthyloxy]-acetoxy]-2.4.6.2''.4''.6''-hexamethyl-*p*-terphenyl [E III **6** 5820]

(*R_p*)-Cyclohexanhexol-(1*r*.2*c*.3*t*.4*c*.5*t*.6*t*) [E III **6** 6925]

- c) Das Symbol *rel* in einem mindestens zwei Chiralitätssymbole [(*R*) bzw. (*S*); s.o.] enthaltenden Namen einer optisch-aktiven Verbindung deutet an, dass die Chiralitätssymbole keine absolute, sondern nur eine relative Konfiguration spezifizieren.

Beispiel:

(+)(*rel-1R:1'S*)-(1*rH*.1'*r'H*)-Bicyclohexyl-dicarbonsäure-(2*c*.2'*t'*) [E III **9** 4021]

- § 2. Die Präfixe *cis* bzw. *trans* geben an, dass sich die beiden Bezugsliganden auf der gleichen Seite (*cis*) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (*trans*) der Bezugsfläche befinden. Bei Olefinen verläuft die „Bezugsfläche“ durch die beiden doppelt-gebundenen Atome und steht senkrecht zu der Ebene, in der die doppelt gebundenen und die vier hiermit einfach verbundenen Atome liegen; bei cyclischen Verbindungen wird die Bezugsfläche durch die Ringatome fixiert.

Beispiele:

β -Brom-*cis*-zimtsäure [E III **9** 2732]

2-[4-Nitro-*trans*-styryl]-pyridin [E III/IV **20** 3879]

5-*cis*-Propenyl-benzo[1,3]dioxol [E III/IV **19** 273]

- 3-[*trans*-2-Nitro-vinyl]-pyridin [E III/IV 20 2887]
trans-2-Methyl-cyclohexanol [E IV 6 100]
cis-2-Isopropyl-bicyclohexyl [E IV 5 352]
 4a,8a-Dibrom-*trans*-decahydro-naphthalin [E IV 5 314]

§ 3. a) Die—bei Bedarf mit einer Stellungsbezeichnung versehenen—Symbole (*E*) bzw. (*Z*) am Anfang eines Namens oder Namensteils kennzeichnen die Konfiguration an vorhandenen Doppelbindungen. Sie zeigen an, dass sich die — jeweils mit Hilfe der Sequenzregel (s. § 1a) ausgewählten — Bezugsliganden an den jeweiligen doppelt gebundenen Atomen auf den entgegengesetzten Seiten (*E*) bzw. auf der gleichen Seite (*Z*) der Bezugsfläche (vgl. § 2) befinden.

Beispiele:

- (*E*)-1,2,3-Trichlor-propen [E IV 1 748]
 (*Z*)-1,3-Dichlor-but-2-en [E IV 1 786]
3endo-[(*Z*)-2-Cyclohexyl-2-phenyl-vinyl]-tropan [E III/IV 20 3711]
 Piperonal-(*E*)-oxim [E III/IV 19 1667]

Anstelle von (*E*) bzw. (*Z*) waren früher die Bezeichnungen *seqtrans* bzw. *seqcis* sowie zur Kennzeichnung von stickstoffhaltigen funktionellen Derivaten der Aldehyde auch die Bezeichnungen *syn* bzw. *anti* in Gebrauch.

Beispiele:

- (3*S*)-9,10-Seco-cholestadien-(5(10),7*seqtrans*)-ol-(3) [E III 6 2602]
 1,1,3-Trimethyl-cyclohexen-(3)-on-(5)-*seqcis*-oxim [E III 7 285]
 Perillaaldehyd-*anti*-oxim [E III 7 567]

b) Die — bei Bedarf mit einer Stellungsbezeichnung versehenen — Symbole (*e*) bzw. (*z*) am Anfang eines Namens oder Namensteils kennzeichnen die Konfiguration (Konformation) an den vorhandenen nicht frei drehbaren Einfachbindungen zwischen zwei dreibindigen Atomen. Sie zeigen an, dass sich die — jeweils mit Hilfe der Sequenzregel (s. § 1a) ausgewählten — Bezugsliganden an den beiden einfach gebundenen Atomen auf den entgegengesetzten Seiten (*e*) bzw. auf der gleichen Seite (*z*) der durch die einfach gebundenen Atome verlaufenden Bezugsgeraden befinden.

Beispiel:

- (*e*)-*N*-Methyl-thioformamid [E IV 4 171]

Mit gleicher Bedeutung werden in der Literatur auch die Bezeichnungen *s-trans* (= *single-trans*) bzw. *s-cis* (= *single-cis*) verwendet.

§ 4. a) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsziffer einer C,C-Doppelbindung geben an, dass die jeweiligen Bezugsliganden an den beiden doppelt-gebundenen Kohlenstoff-Atomen *cis*-ständig (*c*) bzw. *trans*-ständig (*t*) sind (vgl. § 2). Als „Bezugsligand“ gilt an jedem der beiden doppelt-gebundenen Atome derjenige äussere — d. h. nicht der Bezugsfläche angehörende — Ligand, der der gleichen Bezifferungseinheit angehört wie das mit ihm verknüpfte doppelt-gebundene Atom. Gehören beide äusseren Liganden eines der doppelt-gebundenen Atome der gleichen Bezifferungseinheit an, so gilt der niedrigerbezifferte als Bezugsligand.

Beispiele:

- 2-Methyl-oct-3*t*-en-2-ol [E IV 1 2177]
 Cycloocta-1*c*,3*t*-dien [E IV 5 402]

9,11 α -Epoxy-5 α -ergosta-7,22 t -dien-3 β -ol [E III/IV 17 1574]
 3 β -Acetoxy-16 α -hydroxy-23,24-dinor-5 α -chol-17(20) t -en-21-säure-lacton
 [E III/IV 18 470]
 (3S)-9.10-Seco-ergostatrien-(5 t .7 c .10(19))-ol-(3) [E III 6 2832]

- b) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einem doppelt-gebundenen endständigen Kohlenstoff-Atom oder vor der eine „offene“ Valenz an einem solchen Atom anzeigenden Endung -yl geben an, dass dieser Substituent bzw. der mit der „offenen“ Valenz verknüpfte Rest cis-ständig (*c*) bzw. trans-ständig (*t*) (vgl. § 2) zum Bezugsliganden (vgl. § 4a) ist.

Beispiele:

1 t ,2-Dibrom-propen [E IV 1 760]
 1 c ,2-Dibrom-3-methyl-buta-1,3-dien [E IV 1 1005]
 1-But-1-en- t -yl-cyclohexen [E IV 5 431]

- c) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsziffer 2 eines Substituenten am Äthylen-System geben die cis-Stellung (*c*) bzw. die trans-Stellung (*t*) (vgl. § 2) dieses Substituenten zu dem durch das Symbol *r* gekennzeichneten Bezugsliganden an dem mit 1 bezifferten Kohlenstoff-Atom an.

Beispiele:

1.2 t -Diphenyl-1 r -[4-chlor-phenyl]-äthylen [E III 5 2399]

- d) Die mit der Stellungsziffer eines Substituenten (oder den Stellungsziffern einer im Namen durch ein Präfix bezeichneten Brücke eines Ringsystems) kombinierten Symbole *c* bzw. *t* geben an, dass sich der Substituent (oder die mit dem Stamm-Ringsystem verknüpften Brückenatome) auf der gleichen Seite (*c*) bzw. der entgegengesetzten Seite (*t*) der Bezugsfläche befinden wie der Bezugsligand. Dieser Bezugsligand ist durch Hinzufügen des Symbols *r* zu seiner Stellungsziffer kenntlich gemacht.

Bei einer aus mehreren isolierten Ringen oder Ringsystemen bestehenden Verbindung kann jeder Ring bzw. jedes Ringsystem als gesonderte Bezugsfläche für Konfigurationskennzeichen fungieren; die zusammengehörigen Sätze von Konfigurationssymbolen *r*, *c* und *t* sind dann im Namen der Verbindung durch Klammerung voneinander getrennt oder durch Strichelung unterschieden (s. Beispiele 1 und 2 unter Abschnitt e).

Beispiele:

1 r ,2 t ,3 c ,4 t -Tetrabrom-cyclohexan [E IV 5 76]
 1 r -Acetoxy-1,2 c -dimethyl-cyclopentan [E IV 6 111]
 [1,2 c -Dibrom-cyclohex- r -yl]-methanol [E IV 6 109]
 2 c -Chlor-(4 r ,8 at)-decahydro-naphthalin [E IV 5 313]
 5 c -Brom-(3 at ,7 at)-octahydro-4 r ,7-methano-inden [E IV 5 467]

- e) Die mit einem (gegebenenfalls mit hochgestellter Stellungsziffer ausgestatteten) Atomsymbol kombinierten Symbole *r*, *c* oder *t* beziehen sich auf die räumliche Orientierung des indizierten Atoms relativ zur Bezugsfläche.

Beispiele:

1-[(4*aR*)-6*t*-Hydroxy-2*c*.5.5.8*a**t*-tetramethyl-(4*a**rH*)-decahydro-naphthyl-(1*t*)]-2-[(4*aR*)-6*t*-hydroxy-2*t*.5.5.8*a**t*-tetramethyl-(4*a**rH*)-decahydro-naphthyl-(1*t*)]-äthan [E III 6 4829]

2-[(5*S*)-6,10*c'*-Dimethyl-(5*rC*⁶,5*r'**C*¹)-spiro[4.5]dec-6-en-2*t*-yl]-propan-2-ol [E IV 6 419]

(6*R*)-2-ξ-Isopropyl-6*c*,10-ξ-dimethyl-(5*rC*¹)-spiro[4.5]decan [E IV 5 352]

(1*rC*⁸,2*tH*,4*tH*)-Tricyclo[3.2.2.0^{3,4}]nonan-6*c*,7*c*-dicarbonsäure-anhydrid [E III/IV 17 6079]

- § 5. a) Die Präfixe *erythro* und *threo* zeigen an, dass sich die Bezugsliganden (das sind zwei gleiche oder jeweils die von Wasserstoff verschiedenen Liganden) an zwei einer Kette angehörenden Chiralitätszentren auf der gleichen Seite (*erythro*) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (*threo*) der Fischer-Projektion dieser Kette befinden.

Beispiele:

threo-Pentan-2,3-diol [E IV 1 2543]

threo-3-Hydroxy-2-methyl-valeriansäure [E IV 3 849]

erythro-α'-[4-Methyl-piperidino]-bibenzyl-*α*-ol [E III/IV 20 1516]

- b) Das Präfix *meso* gibt an, dass ein mit einer geraden Anzahl von Chiralitätszentren ausgestattetes Molekül eine Symmetrieebene oder ein Symmetriezentrum aufweist. Das Präfix *racem.* kennzeichnet ein Gemisch gleicher Mengen von Enantiomeren, die zwei identische Chiralitätszentren oder zwei identische Sätze von Chiralitätszentren enthalten.

Beispiele:

meso-Pentan-2,4-diol [E IV 1 2543]

meso-1,4-Dipiperidino-butan-2,3-diol [E III/IV 20 1235]

racem.-3,5-Dichlor-2,6-cyclo-norbornan [E IV 5 400]

racem.-(1*rH*.1'*r'H*)-Bicyclohexyl-dicarbonsäure-(2*c*.2'*c'*) [E III 9 4020]

- c) Die „Kohlenhydrat-Präfixe“ *ribo*, *arabino*, *xylo* und *lyxo* bzw. *allo*, *altro*, *gluco*, *manno*, *gulo*, *ido*, *galacto* und *talo* kennzeichnen die relative Konfiguration von Molekülen mit drei Chiralitätszentren (deren mittleres ein „Pseudoasymmetriezentrum“ sein kann) bzw. vier Chiralitätszentren, die sich jeweils in einer unverzweigten Kette befinden. In den nachstehend abgebildeten „Leiter-Mustern“ geben die horizontalen Striche die Orientierung der Bezugsliganden an der jeweils als Fischer-Projektion wiedergegebenen Kohlenstoffkette an¹⁾.



ribo



arabino



xylo



lyxo



allo



altro



gluco



manno



gulo



ido



galacto



talo

¹⁾ Das niedrigstbezahlte Atom befindet sich hierbei am oberen Ende der vertikal dargestellten Kette der Bezifferungseinheit.

Beispiele:

ribo-2,3,4-Trimethoxy-pentan-1,5-diol [E IV 1 2834]

galacto-Hexan-1,2,3,4,5,6-hexaol [E IV 1 2844]

- § 6. a) Die „Fischer-Symbole“ **D** bzw. **L** im Namen einer Verbindung mit einem Chiralitätszentrum geben an, dass sich der Bezugsligand (d. i. der von Wasserstoff verschiedene, nicht der durch den Namensstamm gekennzeichneten Kette angehörende Ligand) am Chiralitätszentrum in der Fischer-Projektion¹⁾ auf der rechten Seite (**D**) bzw. auf der linken Seite (**L**) der Kette befindet.

Beispiele:

D-Tetradecan-1,2-diol [E IV 1 2631]

L-4-Methoxy-valeriansäure [E IV 3 812]

- b) In Kombination mit dem Präfix *erythro* geben die Symbole **D** und **L** an, dass sich die beiden Bezugsliganden auf der rechten Seite (**D**) bzw. auf der linken Seite (**L**) der Fischer-Projektion¹⁾ befinden. Die mit dem Präfix *threo* kombinierten Symbole **D_g** und **D_s** geben an, dass sich der höherbezahlte (**D_g**) bzw. der niedrigerbezahlte (**D_s**) Bezugsligand auf der rechten Seite der Fischer-Projektion¹⁾ befindet; linksseitige Position des jeweiligen Bezugsliganden wird entsprechend durch die Symbole **L_g** bzw. **L_s** angezeigt.

In Kombination mit den in § 5c aufgeführten konfigurationsbestimmenden Präfixen werden die Symbole **D** und **L** ohne Index verwendet; sie beziehen sich dabei jeweils auf die Orientierung des höchstbezahlten (d. h. des in der Abbildung am weitesten unten erscheinenden) Bezugsliganden (die in § 5c abgebildeten „Leiter-Muster“ repräsentieren jeweils das **D**-Enantiomere).

Beispiele:

D-erythro-Nonan-1,2,3-triol [E IV 1 2792]

D_s-threo-1,4-Dibrom-2,3-dimethyl-butan [E IV 1 375]

L_g-threo-Hexadecan-7,10-diol [E IV 1 2636]

D-lyxo-Pentan-1,2,3,4-tetraol [E IV 1 2811]

6-Allyloxy-**D-manno**-hexan-1,2,3,4,5-pentaol [E IV 1 2846]

- c) Kombination der Präfixe **D-glycero** oder **L-glycero** mit einem der in § 5c in der zweiten Formelzeile aufgeführten, jeweils mit einem Fischer-Symbol versehenen Kohlenhydrat-Präfixe dienen zur Kennzeichnung der Konfiguration von Molekülen mit fünf in einer Kette angeordneten Chiralitätszentren (deren mittleres auch „Pseudoasymmetriezentrum“ sein kann). Dabei bezieht sich das Kohlenhydrat-Präfix auf die vier niedrigstbezahlten Chiralitätszentren, das Präfix **D-glycero** oder **L-glycero** auf das höchstbezahlte (d. h. in der Abbildung am weitesten unten erscheinende) Chiralitätszentrum.

Beispiel:

D-glycero-L-gulo-Heptit [E IV 1 2854]

- § 7. a) Die Symbole **c_F** bzw. **t_F** hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einer mehrere Chiralitätszentren aufweisenden Kette geben an, dass sich dieser Substituent und der Bezugssubstituent, der seinerseits durch das Symbol **r_F** gekennzeichnet wird, auf der gleichen Seite

¹⁾ Siehe S. XVI Anm.

(c_F) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (t_F) der Fischer-Projektion befinden. Ist eines der endständigen Atome der Kette Chiralitätszentrum, so wird der Stellungsziffer des „catenoiden“ Substituenten (d. h. des Substituenten, der in der Fischer-Projektion als Verlängerung an der Kette erscheint) das Symbol cat_F beigefügt.

- b) Die Symbole D_r bzw. L_r am Anfang eines mit dem Kennzeichen r_F ausgestatteten Namens geben an, dass sich der Bezugssubstituent auf der rechten Seite (D_r) bzw. auf der linken Seite (L_r) der in Fischer-Projektion¹⁾ wiedergegebenen Kette der Bezifferungseinheit befindet.

Beispiele:

Heptan-1,2 r_F ,3 c_F ,4 t_F ,5 c_F ,6 c_F ,7-heptaol [E IV 1 2854]

L_r -1 c_F ,2 t_F ,3 t_F ,4 c_F ,5 r_F -Pentahydroxy-hexan-1 cat_F -sulfonsäure [E IV 1 4275]

- § 8. Die Symbole *endo* bzw. *exo* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten eines Bicycloalkans geben an, dass der Substituent der niedriger bezifferten Nachbarbrücke zugewandt (*endo*) bzw. abgewandt (*exo*) ist.

Beispiele:

5*endo*-Brom-norborn-2-en [E IV 5 398]

2*endo*,3*exo*-Dimethyl-norbornan [E IV 5 294]

4*endo*,7,7-Trimethyl-6-oxa-bicyclo[3.2.1]octan-3*exo*,4*exo*-diol
[E III/IV 17 2044]

- § 9. Die Symbole *syn* bzw. *anti* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einem Atom der höchstbezifferten Brücke eines Bicycloalkan-Systems oder einer Brücke über ein ortho- oder ortho/perianelliertes Ringsystem geben an, dass der Substituent der Nachbarbrücke zugewandt (*syn*) bzw. abgewandt (*anti*) ist, die das niedrigstbezifferte Ringatom aufweist.

Beispiele:

(3*aR*)-9*syn*-Chlor-1,5,5,8*a*-tetramethyl-(3*a**t*,8*a**t*)-decahydro-1*r*,4-methanoazulen [E IV 5 498]

5*exo*,7*anti*-Dibrom-norborn-2-en [E IV 5 399]

3*endo*,8*syn*-Dimethyl-7-oxo-6-oxa-bicyclo[3.2.1]octan-2*endo*-carbonsäure
[E III/IV 18 5363]

- §10. a) Die Symbole α bzw. β hinter der Stellungsziffer eines ringständigen Substituenten im halbrationalen Namen einer Verbindung mit einer dem Cholestan [E III 5 1132] entsprechenden Bezifferung und Projektionsanlage geben an, dass sich der Substituent auf der dem Betrachter abgewandten (α) bzw. zugewandten (β) Seite der Fläche des Ringgerüsts befindet.

Beispiele:

3 β -Piperidino-cholest-5-en [E III/IV 20 361]

21-Äthyl-4-methyl-16-methylen-7,20-cyclo-veatchan-1 α ,15 β -diol
[E III/IV 21 2308]

3 β ,21 β -Dihydroxy-lupan-29-säure-21-lacton [E III/IV 18 485]

Onocerandiol-(3 β .21 α) [E III 6 4829]

- b) Die Symbole α_F bzw. β_F hinter der Stellungsziffer eines an der Seitenkette befindlichen Substituenten im halbrationalen Namen einer Verbindung der unter a) erläuterten Art geben an, dass sich der Substi-

¹⁾ Siehe S. XVI Anm.

tuent auf der rechten (α_F) bzw. linken (β_F) Seite der in Fischer-Projektion dargestellten Seitenkette befindet, wobei sich hier das niedrigstbezahlte Atom am unteren Ende der Kette befindet.

Beispiele:

16 α ,17-Epoxy-pregn-5-en-3 β ,20 β_F -diol [E III/IV 17 2137]

22 α_F ,23 α_F -Dibrom-9,11 α -epoxy-5 α -ergost-7-en-3 β -ol [E III/IV 17 1519]

- c) Die Symbole α und β , die zusammen mit der Stellungsziffer eines angularen oder eines tertiären peripheren Kohlenstoff-Atoms (im zuletzt genannten Fall ist hinter α bzw. β das Symbol H eingefügt) unmittelbar vor dem Stamm eines Halbrationalnamens erscheinen, kennzeichnen im Sinn von § 10a die räumliche Orientierung der betreffenden angularen Bindung bzw. (im Falle von αH und βH) des betreffenden (evtl. substituierten) Wasserstoff-Atoms, die entweder durch die Definition des Namensstamms nicht festgelegt ist oder von der Definition abweicht [Epimerie].

In gleicher Weise kennzeichnen die Symbole $\alpha_F H$ und $\beta_F H$ im Sinne von § 10b die von der Definition des Namensstamms abweichende Orientierung des (gegebenenfalls substituierten) Wasserstoff-Atoms an einem Chiralitätszentrum in der Seitenkette von Verbindungen mit einem Halbrationalnamen.

Beispiele:

5,6 β -Epoxy-5 β ,9 β ,10 α -ergosta-7,22 t -dien-3 β -ol [E III/IV 17 1573]

(25*R*)-5 α ,20 αH ,22 αH -Furostan-3 β ,6 α ,26-triol [E III/IV 17 2348]

4 βH ,5 α -Eremophilan [E IV 5 356]

(11*S*)-4-Chlor-8 β -hydroxy-4 βH -eudesman-12-säure-lacton [E III/IV 17 4674]

5 α .20 $\beta_F H$.24 $\beta_F H$ -Ergostanol-(3 β) [E III 6 2161]

- d) Die Symbole α bzw. β vor dem halbrationalen Namen eines Kohlenhydrats, eines Glykosids oder eines Glykosyl-Radikals geben an, dass sich der Bezugsligand (d. h. die am höchstbezahlten chiralen Atom der Kohlenstoff-Kette befindliche Hydroxy-Gruppe) und die mit dem Glykosyl-Rest verbundene Gruppe (bei Pyranosen und Furanosen die Hemiacetal-OH-Gruppe) auf der gleichen (α) bzw. der entgegengesetzten (β) Seite der Bezugsgeraden befinden. Die Bezugsgerade besteht dabei aus derjenigen Kette, die die cyclischen Bindungen am acetalischen Kohlenstoff-Atom sowie alle weiteren C,C-Bindungen in der entsprechend § 5c definierten Orientierung der Fischer-Projektion enthält.

Beispiele:

O²-Methyl- β -D-glucopyranose [E IV 1 4347]

Methyl- α -D-glucopyranosid [E III/IV 17 2909]

Tetra-O-acetyl- α -D-fructofuranosylchlorid [E III/IV 17 2651].

- e) Das Präfix *ent* vor dem halbrationalen Namen einer Verbindung mit mehreren Chiralitätszentren, deren Konfiguration mit dem Namen festgelegt ist, dient zur Kennzeichnung des Enantiomeren der betreffenden Verbindung. Das Präfix *rac* wird zur Kennzeichnung des einer solchen Verbindung entsprechenden Racemats verwendet.

Beispiele:

ent-(13*S*)-3 β ,8-Dihydroxy-labdan-15-säure-8-lacton [E III/IV 18 138]

rac-4,10-Dichlor-4 βH ,10 βH -cadinan [E IV 5 354]